低次元系の相転移

九大・理　太 田 隆 夫

§1. はじめに

物理吸着系で起こる相転移について議論する。以下で述べるように，吸着系では，今まで現実性がないと思われていたモデルの相転移のいくつかが出現する可能性がある。二次元系の相転移のうち Kosterlitz-Thouless 転移は先の研究会「物性論と素粒子論」の報告[1] で詳しく述べたのでくりかえさない。また，そこで挙げた引用文献もできるだけここでは重複をさけるようにする。 Kosterlitz-Thouless 転移の日本語による解説として他に文献2）がある。吸着系の相転移については文献3）を参照されたい。

§2. 二次元 Z_p モデル

物理吸着系の相転移を議論する前に二次元古典スピン系の復習をしておこう。面内異方性のあるプレイナーモデルを考える。[4]

$$\mathcal{H} = -J\sum_{<i,j>}\cos(\theta_i-\theta_j) - 2g\sum_i \cos p\theta_i \qquad (0<\theta<2\pi) \tag{1}$$

ここに和 $<i,j>$ は最近接格子点のあらゆる対にわたる。p は自然数であるとする。g が無限大の極限では θ_i の値は離散的となる。このとき(1)を Z_p モデルとよぶ。Z_2 モデル は Ising モデルに他ならない。Z_3 モデルは 3 state Potts モデル[5] と同等である。Z_4 モデルは Ashkin-Teller モデル[6] の decoupling 極限と同等である。[7] すなわち $2\leq p\leq 4$ では Z_p モデルは二次転移をおこす。一方 $p\geq 5$ では Z_p モデルは温度を変化させると2回 Kosterlitz-Thouless 転移を起こし，秩序相，準秩序相そして無秩序相の三つの相が出現する。[4),8)] 準秩序相の温度領域を $T_0<T<T_1$ とすると T_0 は離散的ガウスモデル[9]（ただし結合定数 J を $4\pi^2 J/p^2$ と置きかえる。）の roughening 転移温度で与えられる。T_1 は(1)の g がないときの Kosterlitz-Thouless 転移温度になる。[8] 離散的ガウスモデルはプレイナーモデルを簡単化した Villain モデル[10] とデュアル変換でつながっている。[4]

上に述べた Z_p モデルは $p=4$ をさかいにして転移の性格がかわるという性質は次の事実，すなわち，p state Potts モデルが $p\leq 4$ で二次転移，$p\geq 5$ で一次転移であるという Baxter の厳密な証明[11] を想起させる。これら二つの事実には関連があることは明らかであるが詳しいつながりは完全にはわかっていない。

この節ではすべて正方格子上の系を想定している。

§3. 物理吸着系の相転移 I

第2節で述べた転移が物理吸着系で出現し得ることをここで示す。詳しくは文献12)を参照されたい。

物理吸着系の全エネルギーが吸着原子間の相互作用と substrate と吸着原子の相互作用の部分にわけられるとしよう。もっとも簡単なモデルは次のように書かれる。[13),14)]

$$\mathscr{H}=\mathscr{H}_0+\mathscr{H}_1 \tag{2}$$

$$\mathscr{H}_0=\frac{\mu}{2}\int d^2\boldsymbol{r}\left[\partial_\alpha u_\beta\right]^2 \tag{3}$$

$$\mathscr{H}_1=-2v\int d^2\boldsymbol{r}\sum_i \cos\boldsymbol{M}_i\cdot\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}) \tag{4}$$

ここに $\boldsymbol{u}$ は吸着原子の二成分変位ベクトル。μ は shear modulus. v は substrate との相互作用の強さを表わす。$\boldsymbol{M}_i$ は substrate 表面の最小逆格子ベクトル。(2)では吸着系は非圧縮とした。(2)は次のような意味で二つの転移温度をもつ。まず，吸着系の dislocation が無視できるとすると，

$$T_{\mathrm{M}}=16\pi\mu_{\mathrm{eff}}/M^2 \qquad (M\equiv|\boldsymbol{M}_i|) \tag{5}$$

で転移する。[14)] この温度以下では秩序相（ substrate ポテンシャルの存在のため吸着系は二次元固体。） 一方 $v=0$ で disolation をとり入れると(3)はもう一つの転移

$$T_{\mathrm{m}}=\mu_{\mathrm{eff}}/(4\pi) \tag{6}$$

をもつ。[13)] T_{m} 以上では吸着系は完全に無秩序。（いわゆる hexatic 相[13)]は考えない。）(5), (6)で μ_{eff} はくりこまれた μ をあらわす。一般に

$$\mu_{\mathrm{eff}}(T_{\mathrm{M}})>\mu_{\mathrm{eff}}(T_{\mathrm{m}}) \tag{7}$$

dislocation が存在するとして得られた(6)は substrate ポテンシャル v が十分小さいときにのみ意味があるから，(5), (6)の二つの転移が存在するためには $T_{\mathrm{M}}<T_{\mathrm{m}}$ でなければならない。すなわち

$$M<8\pi \tag{8}$$

(7)より実際は 8π より少し大きな値になるだろう。ここでは吸着格子間かくを単位にしている。吸着系の最小の逆格子ベクトル G_i の大きさを G とすると(8)は

$$p \equiv M/G > 8\pi/G \equiv p_c \tag{9}$$

と書ける。つまり，吸着格子間かくと substrate 格子間かくの比が第2節での p に対応する。正方格子のときは $G=2\pi$ すなわち $p_c=4$，三角格子のときは $G=4\pi/\sqrt{3}$ ，ゆえに $p_c=2\sqrt{3}$ 。(9)は文献13) で得られている結果の特別な場合（ポアソン比 $\sigma=1$）である。

この節のまとめ，「$p>p_c$ では吸着系は温度をあげていくと固体準固体そして液体の三つの相があらわれる。そのときの二つの転移は Kosterlitz-Thouless 転移と同じユニバーサリティクラスに属する。」

§4. 物理吸着系の相転移 II

この節では $p<p_c$ の転移を議論する。第2節のアナロジーからもわかるように $p<p_c$ でではただ1つの転移温度があり，吸着系は固体から液体相に移る。このモデルとして次のようなものを考えよう。

$$\mathscr{H} == -\sum_{<i,j>}\sum_{\alpha} K_\alpha \cos \boldsymbol{G}_\alpha(\boldsymbol{u}_i-\boldsymbol{u}_j) - 2v\sum_i\sum_\beta \cos \boldsymbol{M}_\beta\cdot\boldsymbol{u}_i \tag{10}$$

K_α ($\alpha=1,\cdots 4$) はある常数。$\boldsymbol{G}_1$ と $\boldsymbol{G}_2$ は吸着格子の逆格子ベクトル。$\boldsymbol{G}_3=\boldsymbol{G}_1+\boldsymbol{G}_2$, $\boldsymbol{G}_4=\boldsymbol{G}_1-\boldsymbol{G}_2$ 。$\boldsymbol{M}_\beta$は substrate の逆格子ベクトル。$\boldsymbol{u}_i$ は i 番目の unit cell にいる吸着原子の位置ベクトルである。最近接 unit cell 間の相互作用を仮定した。

今の場合，転移は v_{eff}が大きいところで起こるから，(10)で $v\to\infty$ とする。この結果，(10)は Z_p モデルの二成分系への拡張になっている。

(10)を実際に吸着三角格子系に適用してみよう。系の対称性を $p\times p$ と表わせる。$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 構造のとき(10)は

$$\mathscr{H} = -\sum_{<i,j>} K\cos\frac{2\pi}{3}(\sigma_i-\sigma_j) + \mathrm{const} \tag{11}$$

と変形される。$K=K_1=K_2$， $\sigma=0, 1, 2$ 。(11)は 3 state Potts モデルと同等である。すなわち $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 構造は3 state Potts 転移を示す。このことは知られた結果である。[15] 2×2 構造のときには(10)は

$$\mathscr{H} = -\sum_{<i,j>}\{K[\cos\pi(\sigma_i-\sigma_j)+\cos\pi(\tau_i-\tau_j)]$$

$$+2L\cos\pi(\sigma_i-\sigma_j)\cos\pi(\tau_i-\tau_j)\} \qquad (12)$$

となる。$K=K_1=K_2$, $L=K_3=K_4$ $\sigma, \tau=0, 1$。(12)は Askin-Teller モデルに他ならない。$K=L$のときには 4 state Potts モデルである。また$\sqrt{7}\times\sqrt{7}$構造のときには 7 state Potts 転移すなわち1次転移が生じることをモデルの範囲内で示すことができる。四角格子の場合も同様に適用できる。

§5. おわりに

物理吸着系の相転移を議論した。「カビのはえたような」モデルをひきだしたことがここの主要な目的ではない。二成分クーロンガス系，二成分 sine-Gordon 系，そして（二成分）Z_p モデル等で二次元系の相転移を統一的に理解しようとする最近の試みのすなおな応用として物理吸着系があるということである。また相転移の統計物理学による表面物性へのアプローチという関点に立つと，これはその第一歩にすぎない。

第4節で述べた転移の動的性質を調べるのはこれからの問題である。

この報告では繰り込み群理論を意識的に表面に出さなかった。詳しくは，たとえば文献12)～14)を参照されたい。

参 考 文 献

1) 太田隆夫，物性研究，シンポジウム「素粒子論と物性論」報告（1980）.
2) 恒藤敏彦，日本物理学会誌 35（1980），500.
3) M.N. Barber, Phys. Reports **59** (1980), 375.
4) J.V. José et al, Phys. Rev. **B16** (1977), 1217.
5) R.B. Potts, Proc. Camb. Phil. Soc. **48** (1952), 156.
6) J. Ashkin and E. Teller, Phys. Rev. **64** (1943), 178.
7) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **37** (1967), 770.
8) J.L. Cardy, J. of Phys. **A13** (1980), 1507.
9) たとえば
S.T. Chui and J.D. Weeks, Phys. Rev. **B14** (1976), 4978.
T. Ohta and K. Kawasaki, Prog. Theor. Phys. **60** (1978), 365.
10) J. Villain, J. Phys. (Paris) **36** (1975), 581.
11) R.J. Baxter, J. of Phys. **C6** (1973), L445.
12) T. Ohta, Prog. Theor. Phys. (submitted).

13) D.R. Nelson and B.I. Halperin, Phys. Rev. **B19** (1979), 2457.

14) T. Ohta, Prog. Theor. Phys. **63** (1980), 785.

15) S. Alexander, Phys. Letters **54A** (1975), 353.

A.N. Berker, S. Ostlund and F.A. Putnam, Phys. Rev. **B17** (1978), 3650